

*На правах рукописи*

БАТИН СЕРГЕЙ ЕВГЕНЬЕВИЧ

**МОДЕЛЬ КОМПЛЕКСНОГО ОЦЕНИВАНИЯ  
ПРОЧНОСТНЫХ СВОЙСТВ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ  
МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СИСТЕМНОГО АНАЛИЗА  
ЗЕРЕННО-ФАЗОВОЙ СТРУКТУРЫ**

05.13.01 – Системный анализ, управление и обработка информации  
(технические и информационные системы)

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата технических наук

Пермь – 2020

Диссертационная работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Пермский национальный исследовательский политехнический университет»

Научные руководители

**Столбов Валерий Юрьевич**  
доктор технических наук, профессор

**Гитман Михаил Борисович**  
доктор физико-математических наук, профессор

Официальные оппоненты

**Вологдин Сергей Валентинович**  
доктор технических наук, доцент,  
профессор кафедры «Информационные системы»,  
Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Ижевский государственный технический университет  
имени М.Т. Калашникова»

**Гусев Андрей Леонидович**  
доктор технических наук,  
профессор кафедры «Прикладная математика и  
информатика», Федеральное государственное  
бюджетное образовательное учреждение высшего  
образования «Пермский государственный национальный  
исследовательский университет»

Ведущая организация

Федеральное государственное бюджетное  
образовательное учреждение высшего образования  
«Магнитогорский государственный технический  
университет им. Г.И. Носова»

Защита состоится «29» декабря 2020 года в 14:00 на заседании диссертационного совета Д ПНИПУ. 05.01, созданного на базе ФГБОУ ВО «Пермский национальный исследовательский политехнический университет», по адресу 614990, г. Пермь, Комсомольский пр. 29, ауд. 345.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте университета (<http://www.pstu.ru>).

Автореферат разослан «   » \_\_\_\_\_ 2020 г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
кандидат экономических наук

**Александр Олегович Алексеев**

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

**Актуальность темы исследования.** В современных условиях хозяйственной и производственной деятельности весьма актуальным представляется вопрос использования материалов, имеющих улучшенные эксплуатационные свойства. Такие материалы, имея относительно более высокие показатели механических характеристик таких, как предел текучести, предел прочности, удельный упругий модуль, позволяют добиться значительных преимуществ при снижении веса конструкции или ее стоимости, в то же время сохраняя необходимую прочность. Этого можно добиться, применяя наукоемкие подходы к проектированию микроструктуры таких материалов.

В то же время весьма актуальным является вопрос количественного описания взаимосвязи микро- и макросвойств материалов, поскольку ввиду высокой ее сложности при проведении исследований наиболее часто встречается лишь качественное описание того, почему материал с наблюдаемой микроструктурой имеет измеренные механические свойства. Сложность количественного описания данной взаимосвязи состоит в том, что они определяются видом дефектной микроструктуры в широком диапазоне масштабов: от размеров совокупности из нескольких тысяч зерен, имеющих размеры порядка десятков микрометров или микрометров для мелкозернистых материалов, до характерных масштабов дислокационной структуры, имеющей порядок десятков нанометров. Существующая инструментальная база, применяемая для идентификации микроструктуры, как правило, не позволяет получить достаточно полные данные для структуры в столь широком диапазоне масштабов. Чаще всего проводится лишь исследование микроструктуры на уровне зёрненной структуры. Таким образом, можно говорить о значительной неопределенности исходных данных в задаче системного анализа связи микроструктуры и макроскопических свойств различных материалов, когда исследуемый металлический материал рассматривается как сложная техническая система с иерархической структурой описания на различных масштабных уровнях и нелинейными связями между ними.

Ввиду упомянутой выше неопределенности данных при идентификации параметров микроструктуры, ключевой становится необходимость учета всей доступной информации о характеристиках материала на различных масштабных уровнях и проведение системного анализа данных. Хорошим источником данных могут служить фотографии микрошлифов, широко используемые при металловедческом анализе. Как правило, для качественного объяснения наблюдаемых макроскопических прочностных свойств такие фотографии подвергаются экспертному анализу, при котором делаются выводы о некоторых характерных размерах, например среднем размере зерен, долях фаз, а также морфологии зерен и включений, наличии текстуры материала. Таким образом возникает возможность провести системный анализ связи таких характеристик микроструктуры

металлического материала с измеряемыми в макроскопическом эксперименте его прочностными свойствами.

#### **Степень разработанности темы исследования.**

Исследованию поведения металлических материалов на макроуровне в зависимости от различных параметров термомеханической обработки посвящены работы российских и зарубежных ученых, в частности: Барышникова М.П., Гуна Г.С., Сегала В.М., Cai X., Yu W. и многих других.

Влияние технологий получения и/или обработки материалов на микроструктуру рассмотрены в работах Валиева Р.З., Зельдовича В.И., Ефимовой Ю.Ю., Колобова Ю.Р., Копцевой Н.В., Хейфеца А.Э., Чукина М.В., Гусева А.Л., Kim C.S., Arlazarov A., Zhu R. и других ученых.

Исследованию взаимосвязей между характеристиками структуры материала и его макроскопическими свойствами посвящено также значительное количество работ, среди которых можно выделить исследования Bouaziz O., Галимова Э.Р., Мамина А.С., Наймарка О.Б., Трусова П.В., Varon C., Kim C.S. и других. В последние годы появились работы, в которых делается попытка установления связей между различными объектами, в том числе микро- и макросвойствами металлов и сплавов с помощью нейросетевого моделирования (Клюев А.В., Столбов В.Ю., Толстых А.А., Вологдин С.В., M. Azimi, D. Britz, Brian I. Decost и другие) Однако применение этого метода для исследуемой задачи требует разрешения ряда фундаментальных вопросов, связанных со следующими проблемами: обоснование размеров представительного объема материала, позволяющего с заданной точностью осуществлять переход с микро- на макро- уровень; исследование устойчивости числовых значений свойств материала на макроуровне при малых изменениях характеристик зёрненно-фазовой структуры; исследование устойчивости нейросетевой модели в зависимости от мощности обучающего множества экспериментальных данных. Решение этих вопросов требует получения новых знаний в области распознавания сложных микроструктур материала и идентификации их параметров.

Так или иначе связь микроструктуры и механических свойств материалов рассматривается практически во всех работах, посвященных материаловедению, однако в этих работах связь микроструктуры и макросвойств практически всегда определяется только с качественных позиций. Если же проводится количественное описание связи микроструктуры и макросвойств (Большаков В.И., Касьян О.С., Šimek D. И другие), то, как правило, не проводится оценка комплексов характеристик. Таким образом, разработка алгоритмов комплексной оценки прочностных свойств металлических материалов на основе данных об их микроструктуре является актуальной.

**Объектом исследования** являются металлические функциональные материалы как сложные технические системы.

**Предметом исследования** являются модели и алгоритмы, позволяющие устанавливать системные закономерности и связи между прочностными свойствами металлических материалов и их микроструктурой.

**Цель диссертационного исследования** заключается в повышении эффективности процессов создания функциональных металлических материалов за счет применения моделей и алгоритмов, позволяющих проводить комплексное оценивание прочностных свойств металлического материала на основе системного анализа характеристик его микроструктуры.

Для достижения данной цели были поставлены **следующие задачи**:

1. разработать модель комплексного оценивания прочностных свойств металлических материалов и определить ее входные параметров;
2. разработать алгоритм оценивания размера представительного изображения микроструктуры;
3. обосновать минимальное количество экспериментов и значимых характеристик микроструктуры, позволяющих получить оценку требуемых прочностных свойств;
4. исследовать эффективность предложенных моделей и алгоритмов при создании функциональных металлических материалов.

**Научная новизна** диссертационной работы заключается в следующем:

- предложена оригинальная модель оценивания прочностных свойств материала, отличающаяся использованием нечетких отношений для установления причинно-следственных связей между параметрами микроструктуры и макросвойствами, что дает возможность более эффективно проектировать функциональные материалы;
- разработан алгоритм определения представительности цифровых данных о микроструктуре для оценки макроскопических свойств материала, отличающийся способом генерации модельной объемной структуры, заданием сечения сгенерированной зеренной структуры плоскостью и вычислением размеров представительного изображения на основе статистического критерия;
- разработана методика определения минимально допустимого числа экспериментов и значимых параметров при проведении оценки прочностных свойств металлических материалов в рамках новой модели комплексного оценивания, позволяющая получать оценки с допустимым значением погрешности на основе меньшего числа экспериментов;

**Теоретическая значимость работы** заключается в разработке новых моделей и алгоритмов, позволяющих проводить оценку физико-механических свойств материалов на основе минимальных данных о его зеренно-фазовой структуре и проводить анализ достоверности полученной оценки.

**Практическая значимость** заключается в применении разработанных моделей и алгоритмов при проектировании новых материалов, что упрощает процесс, позволяет уменьшить число натуральных экспериментов и снижает стоимость такого проектирования.

Модель оценивания комплексных свойств материалов реализована в виде программы для ЭВМ «Нечеткий определитель комплексных свойств материалов (НОКСМ)» (Свидетельство о государственной регистрации № 2018661275 от 04.09.2018, Бюл. № 9.).

Предложенные модели и алгоритмы внедрены в производственную и исследовательскую практику предприятия ООО «Research and Development MGTU», что подтверждается актом внедрения от 20.11.2019. Применение разработанных моделей и методик позволяет сократить затраты на 7% за счет обоснованного уменьшения числа необходимых экспериментов.

Разработанные в диссертации модели и алгоритмы также используются в учебном процессе при реализации образовательных программ бакалавриата и магистратуры по направлению «Информационные системы и технологии» ПНИПУ, что подтверждается соответствующим актом внедрения.

**Теоретическую и методологическую основу исследований** составляют положения системного анализа, теории нечетких множеств, теории вероятностей и математической статистики, методы оптимизации и комплексного оценивания.

**На защиту выносятся следующие основные результаты:**

1. Модель комплексного оценивания прочностных свойств металлических материалов на основе системного анализа зеренно-фазовой структуры (соответствует пп. 5 и 11 паспорта специальности);

2. Алгоритм определения размеров представительного изображения микроструктуры при оценке прочностных свойств (соответствует пп. 5 и 12 паспорта специальности);

3. Методика определения минимально допустимого числа экспериментов и значимых параметров при проведении оценки прочностных свойств металлических материалов (соответствует пп. 5 и 11 паспорта специальности);

**Достоверность результатов исследования** определяется корректным использованием современных математических методов, широкой успешной практикой применения методов теории нечетких множеств в других предметных областях, верификацией полученных теоретических результатов в экспериментах на реальных данных.

**Апробация результатов диссертации.** Работа по теме диссертации выполнялась в рамках международного проекта (уникальный идентификатор проекта RFMEFI58617X0055) по программе «Горизонт 2020» на 2016-2020 гг.

Результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались на научно-методических семинарах кафедры «Вычислительная математика, механика и биомеханика» ПНИПУ; XXIV и XXV Всероссийских школах-конференциях молодых ученых и студентов «Математическое моделирование в естественных науках» (г. Пермь, 2015, 2016); XIV Всероссийской школо-конференции молодых ученых «Управление большими системами» УБС-2017 (г. Пермь, 2017); Международной научно-технической молодежной конференции «Перспективные материалы конструкционного и медицинского

назначения» (г. Томск, 2018); VIII и IX Всероссийских научных конференциях с международным участием «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред» (г. Москва, 2018, 2019); Международной научно-технической конференции «Функциональные материалы: прогнозирование свойств и технологии изготовления» (г. Пермь, 2019).

**Публикации.** Основное содержание работы опубликовано в 17 печатных работах, из них четыре статьи в ведущих рецензируемых научных изданиях, в том числе три статьи индексированы в международных базах цитирования Scopus и WoS; получено одно свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ и один патент на изобретение.

**Структура и объем диссертации.** Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения, списка литературы и приложений. Работа изложена на 135 листах машинописного текста, содержит 21 рисунок и 17 таблиц.

## **ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ**

**Во введении** описывается актуальность диссертационной работы, сформулированы объект и предмет исследования, цель работы и основные задачи, ее теоретическая и практическая значимость, раскрыта научная новизна, отмечены основные положения, выносимые на защиту.

**В первой главе** обозначены основные проблемы, возникающие при разработке и производстве металлических функциональных материалов, приведена формулировка проблемы описания связи макроскопических прочностных свойств таких материалов и их характеристик микроструктуры. Приведен обзор актуальных работ, посвященных описанию этой связи с качественных и количественных позиций.

Как известно, свойства любого металлического материала определяются его внутренней структурой, которая, в свою очередь, зависит от химического состава, технологии получения и последующей обработки материала посредством механических, химических, термических и других воздействий. Таким образом, управляя структурой металла, можно получать материалы с требуемыми сочетаниями свойств.

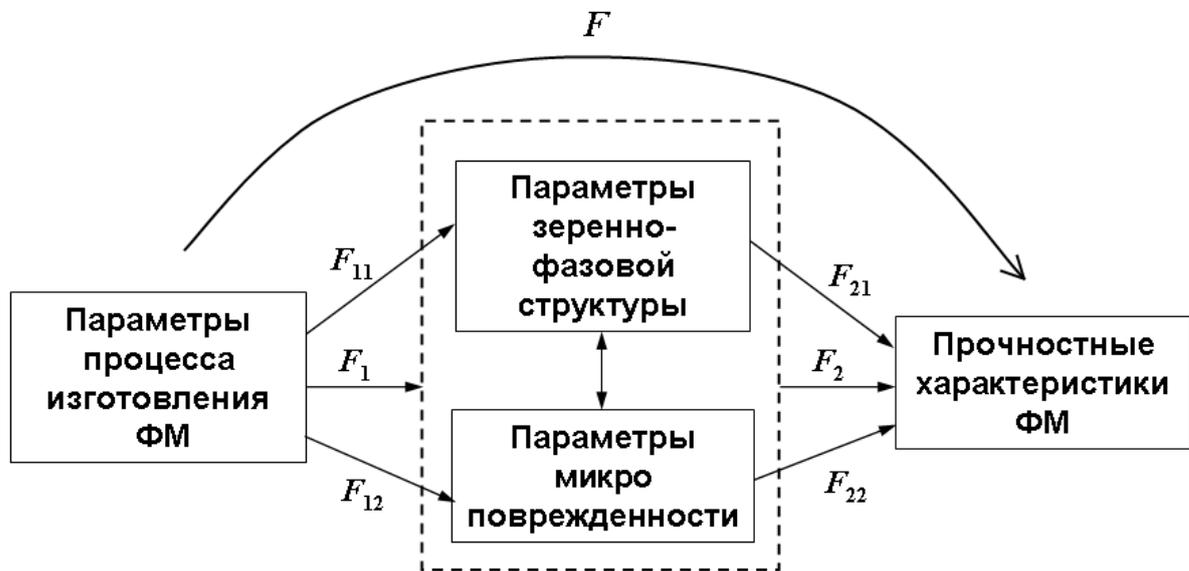
Подавляющее большинство металлических материалов, предназначенных для различных сфер деятельности человека, используется в качестве конструкционных материалов (КМ) в машиностроении, строительстве, быту и пр. Отличительным свойством КМ является крупнотоннажность их производства, ограниченная номенклатурность в масштабах одного предприятия и широкие возможности взаимозаменяемости.

В настоящее время всё чаще ставится задача производства так называемых функциональных материалов (ФМ) - то есть материалов, которые обладают заранее заданным эксплуатационными свойствами (электрическими, магнитными, прочностными, химическими и др.). ФМ должны обладать строго определенными и желательными настраиваемыми физическими и химическими свойствами, дающими возможность

реализовывать служебные характеристики конструкций и устройств, недостижимые при использовании других материалов. Создание ФМ с оптимальными свойствами осуществляется путем усиления или подавления каких-либо свойств уже имеющихся материалов и невозможно без привлечения современных экспериментальных и теоретических подходов. Следует отметить, что в последнее время понятие «функциональный материал» часто стали трактовать в более расширенном виде, понимая иногда под функциональным материалом не просто материал, а некоторую конструкцию, позволяющую обеспечивать заданный набор эксплуатационных свойств.

Из вышесказанного можно утверждать, что функциональные металлические материалы (ФММ) представляют собой сложные технические системы, создаваемые специализированным образом для работы в заданных условиях. При этом таким системам свойственна сложная структура на микроуровне, задаваемая в процессе их технологической обработки и определяющая область применимости созданного материала.

Представим процесс комплексного оценивания свойств ФММ в виде схемы (рис. 1). Входными параметрами двухуровневой модели комплексного оценивания свойств функционального материала выступают параметры химического состава сплавов и их технологической обработки. В качестве выходных параметров модели можно принять макроскопические эксплуатационные свойства ФММ.



**Рис. 1. Двухуровневая модель комплексного оценивания прочностных свойств функциональных металлических материалов**

В представленной на рис. 1 схеме оператор  $F$  описывает зависимость набора прочностных свойств ФММ от параметров процесса их изготовления. Как правило, получение этого оператора в явном виде является слишком трудоемкой задачей ввиду сложности физического описания процессов при изготовлении ФММ и высокой неопределенности исходных данных для построения моделей таких процессов. Задача создания ФММ может быть

формально сформулирована как построение обратного оператора  $F^{-1}$ , позволяющего получить параметры обработки на основе требуемых эксплуатационных свойств. Ввиду сложности получения в явном виде прямого оператора  $F$  обычно проводится декомпозиция задачи и в качестве промежуточного уровня рассматривается микроструктура материала, которая в случае ФММ может быть представлена в виде набора характеристик, относящихся к размерам и морфологии зеренной структуры, а также фазовому составу. Таким образом, можно полагать, что оператор  $F_1$  будет описывать, связь микроструктуры от технологических процессов производства, а оператор  $F_2$  – отношения между макроскопическими свойствами и заданной микроструктурой. В данной работе исследуются только связи между макроскопическими свойствами материала и его микроструктурой.

**Вторая глава** посвящена содержательной и математической постановке задачи комплексного оценивания свойств функциональных металлических материалов на основе данных об их микроструктуре, то есть получению приближенного вида оператора  $F_2$  для материала с заданным химическим составом и обработанного известным способом.

Пусть задан некоторый набор образцов материала. Для каждого из образцов получены значения микро- и макросвойств материала. В качестве характеристик микроструктуры могут рассматриваться полученные на основе анализа фотографий микрошлифов материала данные о среднем размере зерна, коэффициенте вариации размера зерна, объемных долях фаз, анизотропии и ориентации зерен или же фрактальные характеристики. В контексте задачи комплексного оценивания свойств будем считать имеющиеся оценки параметров микроструктуры достоверными, хотя в случае решения прикладных задач достоверность этих данных требует дополнительной оценки, один из аспектов которой будет рассмотрен в следующей главе. Рассматриваемыми макросвойствами могут быть предел текучести, твердость или усталостная прочность. Требуется, исходя из анализа характеристик микроструктуры материала, оценить его макроскопические свойства.

Пусть количество выбранных характеристик микроструктуры равно  $k$ , количество параметров, характеризующих требуемый комплекс эксплуатационных свойств функционального материала, равно  $r$ . Будем считать, что количество имеющихся экспериментов (микрошлифов и соответствующих каждому из них замеров эксплуатационных свойств) равно  $l$ . Тогда искомая связь может быть описана в виде нечетких отношений  $S^i$  между характеристиками микроструктуры и эксплуатационными свойствами материала:

$$S^i = A^i \times B^i, \quad i = \overline{1, l} \quad (1)$$

где  $A^i$  – нечеткое множество, содержащее характеристики структуры в  $i$ -м эксперименте;  $B^i$  – нечеткое множество, содержащее эксплуатационные свойства материала;  $\times$  – знак декартова произведения нечетких множеств.

Конкретный вид этих нечетких множеств должен определяться из контекста задачи и имеющихся экспериментальных данных. Таким образом, для каждого эксперимента будет определено отношение связи (1) между нечеткими множествами.

Связь между некоторым произвольным (*тестируемым*) множеством  $A^{мест}$ , описывающем микроструктуру в рассматриваемом эксперименте, и индуцируемым им множеством  $B^{мест}$ , описывающем эксплуатационные свойства, можно определить как:

$$F_2 = S = \bigcup_{i=1}^l S^i. \quad (2)$$

При этом индуцируемое множество можно определить следующим образом:

$$B^{мест} = A^{мест} \circ S, \quad (3)$$

где « $\circ$ » – знак максиминного произведения. Таким образом, полученное нечеткое отношение  $S$  представляет собой упомянутый выше оператор  $F_2$ , описывающий связь микроструктуры с макроскопическими свойствами.

Отметим, что в общем случае вид функции принадлежности для построения нечеткого множества в соотношениях (1)-(3) может быть выбран отдельно для каждой из характеристик, исходя из экспертных оценок. При этом с большой степенью уверенности можно полагать, что функция принадлежности принимает максимальное значение, если значение элемента носителя совпадает с экспериментальным значением характеристики.

Решение задачи комплексного оценивания прочностных свойств с использованием методов теории нечетких множеств дает возможность использовать для проведения оценки значительно меньшее количество исходных экспериментов, чем методы на основе математических методов планирования экспериментов или искусственных нейронных сетей. Также предлагаемая модель позволяет достаточно универсальное ее использование для широких наборов параметров микро- и макросвойств материала, полученных в результате эксперимента. Кроме того, применение выбранного метода решения связано с использованием значительно меньших вычислительных ресурсов по сравнению с физическими или мезомеханическими моделями, устанавливающими закономерности между характеристиками микроструктуры и прочностными свойствами материала. Таким образом, разработанная модель комплексного оценивания прочностных свойств позволяет получить на основе относительно небольшого числа экспериментов инструмент прогнозирования эксплуатационных свойств материала на основе данных о его микроструктуре.

**В третьей главе** описывается алгоритм оценки представительности изображения микроструктуры металлического функционального материала. Приведен обзор методов определения представительного объема материала, выполнено обобщение понятия «представительный» для плоских изображений микрошлифов металлов, описан алгоритм определения размеров представительного изображения микроструктуры, проведена оценка размеров

представительных изображений для исследуемого класса металлических материалов.

В качестве представительного изображения микроструктуры материала будем считать плоскую фотографию микрошлифа, позволяющую определить необходимый комплекс характеристик микроструктуры материала с наперед заданной точностью. То есть размер *представительного* изображения микроструктуры материала должен быть таким, что его дальнейшее увеличение повышает точность определения комплекса характеристик микроструктуры *несущественно*.

В работе предлагается следующий алгоритм оценки размеров представительного изображения для набора характеристик, относящихся к зеренной структуре материала: генерация модельной объемной структуры, вычисление сечения сгенерированной структуры плоскостью, вычисление размеров представительного изображения на основе статистического критерия. Более подробно описание алгоритма будет выглядеть следующим образом:

1. Генерация модельной объемной структуры осуществляется исходя из предположений, что зеренная структура материала является эллипсоидальной, а также известны некоторые априорные распределения параметров формы и размера зерен-эллипсоидов и материал является изотропным, то есть ориентации наибольших осей эллипсоидов распределены равномерно в пространстве поворотов. Генерируется набор эллипсоидов с заданными априорными распределениями, центры которых равномерно распределяются в контейнере, размер которого равен среднему суммарному объему генерируемых эллипсоидов.

2. Вычисление сечения модельной структуры плоскостью, под которым будем понимать набор параметров эллипсов, лежащих в некоторой заданной плоскости, проходящей через центр контейнера. Зная уравнения составляющих сгенерированную структуру эллипсоидов, можно получить набор уравнений эллипсов, которые будут соответствовать наблюдаемому на микрошлифе материала набору зерен. На основе уравнений эллипсов могут быть аналитически рассчитаны характеристики, соответствующие размеру зерен, их неравноосности и ориентации.

3. Для каждого характерного размера на полученном сечении выбирается набор окон, по каждому из которых проводится оценка комплекса характеристик микроструктуры, а также комплекс характеристик микроструктуры оценивается на всем полученном сечении, то есть на максимально возможном окне.

Изначально алгоритм строится таким образом, чтобы размер полученного сечения был гарантированно существенно больше размера искомого представительного изображения микроструктуры, так что оценки характеристик, полученные на всем сечении, могут считаться наиболее точными. На основе полученных данных для каждого характерного размера вычисляется статистический критерий  $V_\alpha$ , представляющий собой выборочное

среднеквадратичное отклонение, отнесенное к истинному значению характеристики (среднему значению по всему сгенерированному сечению), то есть для характеристики  $\alpha$  формула статистического критерия примет вид:

$$V_{\alpha}(l) = \sqrt{\frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (\alpha_i - \bar{\alpha})^2} / \alpha^* , \quad (4)$$

где  $n$  – количество окон, по которым проводилась оценка параметра;  $l$  – размер окон, по которым строится выборка;  $\alpha_i$  – значение оценки в  $i$ -м окне;  $\bar{\alpha}$  – среднее значение оценки по всем окнам;  $\alpha^*$  – значение оценки для всего сечения.

Выбрав пороговое значение статистического критерия, можно оценить размер представительного изображения микроструктуры. В таблице 1 представлены значения представительного изображения для структуры металлов, близкой к анализируемым. Результаты представлены в безразмерном виде.

**Таблица 1. Размеры представительного изображения микроструктуры, отнесенные к среднему радиусу зерна, с точностью до целых**

Средний размер зерна	Коэффициент вариации размера зерна	Средняя анизотропия зерен	Средняя ориентация зерен
24	42	12	32

Можно сказать, что для каждой характеристики микроструктуры размер представительного изображения будет различным. В качестве размера представительного изображения для комплекса характеристик микроструктуры примем максимальное значение. Таким образом, представительным будем считать размер фотографии микрошлифа, превосходящий средний радиус зерна в объемной структуре в 42 раза. Под средним радиусом зерна здесь понимается радиус шара с объемом, равным среднему объему зерен в трехмерной структуре.

**Четвертая глава** посвящена применению описанных моделей и алгоритмов для оценки свойств металлических материалов к данным, полученным в ходе натурального эксперимента. Применяются алгоритмы по определению минимально допустимого количества экспериментов и выявлению значимых характеристик микроструктуры для выбранного комплекса прочностных свойств. Проводится оценка устойчивости в стохастическом смысле для полученных значений макросвойств. Приводятся анализ полученных результатов и рекомендации по внедрению разработанных моделей в практику создания металлических функциональных материалов.

Для проведения оценок макроскопических свойств материала была реализована программа «Нечеткий определитель комплексных свойств материала» (НОКСМ). Реализованное программное обеспечение позволяет оценивать макроскопические свойства материала на основе данных о его микроструктуре, реализуя подход, описанный в главе 2 настоящей диссертации. В таблице 2 представлены результаты измерения

микроструктурных характеристик образцов, полученных в НИИ Наносталей при Магнитогорском государственном техническом университете в экспериментах по термообработке арматурной стали. Вычисление параметров структуры проводилось с использованием алгоритмов и программ, описанных в диссертационной работе С.И. Шарыбина. Размер исходных фотографий микрошлифов, полученных при увеличении  $\times 250$ , на основе которых выполнялись оценки характеристик микроструктуры, соответствует полученным в главе 3 настоящей диссертации оценкам представительности для данного материала.

**Таблица 2. Характеристики зеренно-фазовой структуры стали и механические свойства, полученные в результате натуральных экспериментов**

№ п/п	Скорость охлаждения, °C/c	Средний размер зерна, мкм	Коэффициент вариации размера зерна	Степень анизотропии	Объемное содержание зерен	Доля ФКС, %	Доля бейнита, %	Доля мартенсита, %	Твердость материала $HV_{30}$	Ударная вязкость $KC$ , дж/см <sup>2</sup>
1	10	0.10	0.11	0.98	0.87	100	0	0	400	54.3
2	20	0.10	0.07	1.14	0.86	60	10	30	412	55.6
3	25	0.16	0.06	1.09	0.94	70	20	10	436	58.5
4	30	0.26	0.17	1.18	0.98	70	20	10	469	64.0
5	40	0.25	0.03	1.25	0.87	50	30	20	554	55.7
6	50	0.21	0.06	1.1	0.79	40	30	30	617	50.1
7	60	0.13	0.07	1.08	0.91	10	0	90	800	44.6

По представленному в главе 2 алгоритму для рассматриваемой марки сталей выполним оценку макроскопических свойств и вычислим погрешность такой оценки по отношению к известным значениям свойств, определенным в эксперименте.

Нечеткие множества для составления отношений будем формировать следующим образом:

- выберем минимальное и максимальное значение характеристики микроструктуры или макросвойства;
- количество элементов носителей нечетких множеств, равное количеству доступных экспериментов, расположим таким образом, чтобы между соседними значениями были равные интервалы, а наибольшее и наименьшее значение *носителей* располагались на расстоянии половины этого интервала правее максимального и левее минимального *экспериментальных значений* соответственно;
- принадлежность будем выбирать так, чтобы она равнялась единице при равенстве экспериментальному значению и линейно убывала при отклонении от значения в  $i$ -м эксперименте, становясь равной нулю при

отклонении, равном длине интервала между значениями носителей нечеткого множества.

Пример нечеткого множества для характеристик микроструктуры в 6-м эксперименте:

$$A^6 = \{0 \setminus 0,08; 0 \setminus 0,12; 0 \setminus 0,15; 0,06 \setminus 0,18; 0,94 \setminus 0,21; 0 \setminus 0,24; 0 \setminus 0,28; 0 \setminus 0,02; 0,43 \setminus 0,04; 0,57 \setminus 0,07; 0 \setminus 0,1; 0 \setminus 0,13; 0 \setminus 0,16; 0 \setminus 0,18; 0 \setminus 0,95; 0 \setminus 1,01; 0,28 \setminus 1,06; 0,72 \setminus 1,12; 0 \setminus 1,17; 0 \setminus 1,22; 0 \setminus 1,28; 0,5 \setminus 0,77; 0,5 \setminus 0,81; 0 \setminus 0,85; 0 \setminus 0,88; 0 \setminus 0,92; 0 \setminus 0,96; 0 \setminus 1; 0 \setminus 1; 0 \setminus 19; 0,83 \setminus 37; 0,17 \setminus 55; 0 \setminus 73; 0 \setminus 91; 0 \setminus 109; 0 \setminus -3; 0 \setminus 3; 0 \setminus 9; 0 \setminus 15; 0 \setminus 21; 0,5 \setminus 27; 0,5 \setminus 33; 0 \setminus -9; 0 \setminus 9; 0,83 \setminus 27; 0,17 \setminus 45; 0 \setminus 63; 0 \setminus 81; 0 \setminus 99\}$$

Для выполнения оценки макроскопических свойств будем рассматривать образец № 5. В таблице 3 приведены результаты вычислений твердости по Виккерсу и ударной вязкости для этого образца, экспериментальные значения рассматриваемых свойств, и вычисленные относительные погрешности.

**Таблица 3. Результаты оценки механических свойств и их сравнение с экспериментальными данными**

Твердость материала $HV_{30}$ (эксперимент)	Твердость материала $HV_{30}$ (оценка)	Относительная погрешность $HV_{30}$ , %	Ударная вязкость $KC$ , дж/см <sup>2</sup> (эксперимент)	Ударная вязкость $KC$ , дж/см <sup>2</sup> (оценка)	Относительная погрешность $KC$ , %
554	525.99	5.06	55.7	54.73	1.73

При оценке в качестве исходных данных использовались все доступные эксперименты, а также весь набор измеренных характеристик микроструктуры.

Далее решалась задача минимизации количества экспериментов и определения значимых характеристик микроструктуры, существенно влияющих на заданный комплекс прочностных свойств исследуемого материала. Рассмотрим получаемые оценки, например, твердости по Виккерсу для набора экспериментов, представленных в таблице 2. Обозначим максимальную допустимую погрешность как  $\delta_{HV}$ , минимальное количество экспериментов  $i^*$  будет определяться соотношением

$$\delta_n^i \leq \delta_{HV}^*, \quad (5)$$

где  $\delta_n^i$  представляет собой среднюю теоретическую погрешность по всем возможным комбинациям исходных экспериментов.

Для определения значимых характеристик можно воспользоваться следующим подходом, аналогичным подходу к определению минимально допустимого числа экспериментов: определим погрешность оценки твердости по Виккерсу на основании каждой из характеристик микроструктуры, а затем выберем те характеристики, при использовании которых погрешность оценки не превышает заданную допустимую величину. Однако предложенный подход не учитывает комплексное влияние характеристик микроструктуры на макроскопические свойства материала.

Значимыми характеристиками с номерами  $j^{**}$  будем считать те, которые удовлетворяют соотношению

$$\delta_{HV}^{j^{**}} \geq \delta_{HV}^{**}, \quad (6)$$

где  $\delta_{HV}^{**}$  – заданная погрешность. Другими словами, если при исключении характеристики из рассмотрения погрешность остается меньше заданной величины, то влиянием такой характеристики можно пренебречь.

Используя описанный подход, выберем наиболее значимые характеристики для определения макроскопических свойств материала. В качестве *базового* эксперимента выберем 5 эксперимент. По результатам 6 экспериментов (исключая эксперимент №5) по методике, описанной выше были просчитаны значения теоретической твердости по Виккерсу для 5-го эксперимента при исключении каждой характеристики зёрно-фазовой структуры. Результаты расчетов сведены в табл. 4.

**Таблица 4. Влияние характеристик микроструктуры на твердость материала**

Характеристика микроструктуры	Твердость по Виккерсу $HV_{30}$	Относительная погрешность $\delta_{HV}^{j^{**}}$ , %
Объемная доля ФКС	519.86	6.16
Объемная доля бейнита	523.9	5.43
Объемная доля мартенсита	518.04	6.48
Средний размер зерна	517.11	6.65
Коэффициент вариации размера зерна	526.85	4.90
Степень анизотропии зерен	525.12	5.21
Объемная доля зерен	507.06	8.47

По данным, представленным в табл.4, можно заметить, что наименьшая относительная погрешность наблюдается при исключении из рассмотрения коэффициента вариации размера зерна. Принимая величину заданной погрешность  $\delta_{HV}^{**}$  равной 5%, можно исключить рассмотрение коэффициента вариации размера зерна при оценке твердости по Виккерсу, поскольку это не приводит к увеличению погрешности выше принятого значения.

Далее определим минимально допустимое количество экспериментов, требуемое для определения макросвойств материала с заданной точностью.

Чтобы определить необходимое число экспериментов для обеспечения приемлемой точности, проведем все возможные численные эксперименты для нахождения искомых эксплуатационных свойств базового образца. Начнем с одного эксперимента, потом выберем два эксперимента и т.д. При этом количество возможных расчетов для  $i$  экспериментов равно  $C_{n-1}^i$ , где  $i = 1, 2, 3, \dots, n-1$ .  $C_{n-1}^i$  – число сочетаний из  $n-1$  по  $i$ , которое определяется обычной формулой сочетаний:

$$C_{n-1}^i = \frac{(n-1)!}{i!*(n-1-i)!}, \quad (7)$$

Пусть, например,  $n=7, i=2$ . Тогда  $C_6^2 = \frac{6!}{2!*4!} = 15$ ;  $n=7, i=3$ . Тогда  $C_6^3 = \frac{6!}{3!*3!} = 20$  и т.д. При каждом  $i$  получаем свою погрешность расчетов. Если определить необходимую точность как  $\delta_{HV}^*$  то минимальное количество необходимых экспериментов  $i^*$  определится из условия (5). Результаты вычислительных экспериментов сведем в табл.5.

**Таблица 5. Влияние количества экспериментов на точность оценки макроскопических свойств материала**

Число экспериментов	Количество сочетаний	Твердость по Виккерсу $HV_{30}$	Относительная погрешность $\delta_{HV}^*$ , %
1	6	499.3	9.87
2	15	507.9	8.32
3	20	515.5	6.95
4	15	520.8	5.99
5	6	524.1	5.40
6	1	527.1	4.86

Как видно из табл. 5 относительная погрешность монотонно снижается при увеличении числа экспериментов, что качественно свидетельствует о применимости предложенного подхода. Принимая, как и в случае определения значимых характеристик, задаваемую погрешность  $\delta_{HV}^*$  равной 5%, получаем, что для определения твердости по Виккерсу минимальным является количество экспериментов, равное 6.

Рассмотрим устойчивость получаемого решения. Устойчивость будем рассматривать в смысле стохастической устойчивости оценок макросвойств ФММ по отношению к возмущению его характеристик микроструктуры. Критерий устойчивости будем строить на основании определения стохастической или  $P$ -устойчивости, которое можно сформулировать следующим образом:

*Для любой вероятности  $P^*$  существует такая вероятность  $P^{**}(P^*)$ , что для любого  $\varepsilon > 0$  может быть найдено  $\delta(\varepsilon) > 0$ , такое что при выполнении условия*

$$P\left(\|x_0 - x_0^*\|_{N_1} < \delta\right) \geq P^{**} \quad (7)$$

*выполняется условие*

$$P\left(\|x - x^*\|_{N_2} < \varepsilon\right) \geq P^*. \quad (8)$$

*Тогда полученное значение оценки макроскопической эксплуатационной характеристики может считаться  $P$ -устойчивым, иначе оно полагается  $P$ -неустойчивым.*

Нормы  $N_1$  и  $N_2$  являются детерминированными, то есть вычисляются для отдельных реализаций случайных величин в пространстве событий.

На основе приведенного определения был предложен следующий алгоритм оценки устойчивости полученных макроскопических свойств

материала. Примем значение вероятности  $P^*$  равным 0,90, что значит, что при возмущении исходных характеристик микроструктуры *доля* возмущенных макросвойств будет составлять не более 0,1. Значение параметра  $\delta$  будем принимать таким образом, что оно является максимально возможным с принятой вероятностью отклонения  $P^*$ . Значение параметра  $\varepsilon$  определяет, какое относительное отклонение в значении макросвойства мы можем считать *малым*. Примем значение параметра  $\varepsilon$  равным 0,05.

Рассмотрим все возможные возмущения параметров микроструктуры на величину принятой  $\delta$ . Пусть общее количество таких возмущенных наборов характеристик микроструктуры равно  $N$ , при этом в  $M$  случаях значения макросвойств отклоняются от невозмущенных на относительную величину меньшую  $\varepsilon$ . Тогда оценку макросвойства будем считать  $P$ -устойчивой, если вероятность ее малого отклонения ( $P=M/N$ ) не меньше заданной  $P^*$ . В случае оценки устойчивости нескольких свойств в предположении о том, что их устойчивости стохастически независимы, можно сформулировать критерий устойчивости для комплекса из  $n$  свойств:

$$P = P_1 \cdot P_2 \cdot \dots \cdot P_n \geq P^* . \quad (12)$$

В табл. 6 приведены результаты исследования на  $P$ -устойчивость (0,90-устойчивость) оценок значений временного сопротивления и микротвердости образцов стали 80 на основании значений следующих характеристик микроструктуры: доля феррита, доля ФКС, среднее межпластинчатое расстояние.

**Таблица 6 Анализ стохастической устойчивости оценки прочностных характеристик стали 80 ( $\varepsilon = 0.05$ ,  $P^* = 0.90$ )**

Значение $\delta$	$P$ для временного сопротивления	$P$ -устойчивость	$P$ для микротвердости	$P$ -устойчивость
0.025	0.98	Да	0.91	Да
0.05	0.97	Да	0.90	Да
0.20	0.948	Да	0.81	Нет

На основе проведенного анализа можно сделать вывод, что оценка временного сопротивления стали 80 является стохастически устойчивой при всех выбранных значениях  $\delta$  с различной вероятностью, в то время как оценка микротвердости не является стохастически устойчивой при больших относительных отклонениях значений параметров.

Предложенные модели и алгоритмы внедрены в производственную и исследовательскую практику предприятия ООО «Research and Development MGTU». Внедрены модель комплексного оценивания прочностных свойств упрочненных сталей на основе теории нечетких множеств и системного анализа зеренно-фазовой структуры в составе программы для ЭВМ «НОКСМ», методика определения минимально допустимого числа экспериментов и значимых параметров при оценке прочностных свойств ФММ, алгоритм определения размеров представительного изображения. Применение разработанных моделей и методик позволяет сократить затраты на 7% за счет обоснованного уменьшения числа экспериментов, примерно на 13%.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Выполнен анализ современных подходов к определению свойств функциональных металлических материалов (ФММ) на основе данных о его микроструктуре. Выявлены основные зависимости между характеристиками микроструктуры и значениями физико-механических макроскопических свойств материалов, отмеченные в литературе. На основе проведенного системного анализа выбран набор характеристик микроструктуры, необходимый для комплексной оценки требуемых прочностных свойств. Разработана модель комплексного оценивания свойств ФММ на основе системного анализа его микроструктуры, позволяющая на основе аппарата теории нечетких множеств выявлять системные связи между характеристиками микроструктуры и макросвойствами исследуемого материала.

2. Разработан алгоритм определения размеров представительного изображения микроструктуры материала, выполнена оценка размеров представительного изображения для исследуемого класса ФММ. Разработанный алгоритм позволил оценить представительность фотографий микрошлифов различных увеличений, принадлежащего к заданному классу материалов; сделан вывод о представительности микрошлифов сталей, полученных с увеличением  $\times 250$ . Показано, что для исследуемой группы сталей представительным можно считать размер фотографии микрошлифа, превосходящий средний радиус зерна в объемной структуре в 42 раза, где под средним радиусом зерна понимается радиус шара с объемом, равным среднему объему зерен в трехмерной структуре.

3. Разработана методика определения значимых характеристик микроструктуры и минимально допустимого количества экспериментов при определении эксплуатационных свойств материала, позволяет сократить количество натуральных экспериментов при проектировании новых ФММ. Показано, что, например, при создании технологии получения арматурной стали путем термообработки для оценки набора прочностных свойств с заданной точностью достаточно измерять 6 существенных параметров микроструктуры и провести не менее 6 экспериментов для различных скоростей охлаждения стали при закалке.

4. Разработанная модель комплексного оценивания свойств ФММ и предложенные алгоритмы легли в основу математического обеспечения программы для ЭВМ «НОКСМ», внедрение которой в производственную и исследовательскую практику ООО «Research and Development MGTU» позволило сократить затраты на разработку новых материалов на 7% за счет обоснованного уменьшения числа экспериментов, примерно на 13%. Также результаты диссертации внедрены в учебный процесс ПНИПУ при реализации образовательных программ по направлению «Информационные системы и технологии».

## Список основных работ, опубликованных автором по теме диссертации

### *Публикации в изданиях, индексируемых в международных реферативных базах и системах цитирования*

1. Гитман М.Б., Скрябин В.Л., Сотин А.В., Столбов В.Ю., **Батин С.Е.** Методика комплексного оценивания эксплуатационной долговечности функционального материала при эндопротезировании тазобедренного сустава. Сообщение 1. // Российский журнал биомеханики. – 2017. – №4. – С. 365–375.

2. Bartolomey M., Boyarshinov D., **Batin S.**, Gitman M., Oborin V. Influence of microdamage structure on fatigue resistance of metal functional material // Proceedings of the International Conference "Actual Issues of Mechanical Engineering" (AIME 2018). – 2018. – 5 p. – DOI: 10.2991/aime-18.2018.15.

3. Gitman I.M., Gitman M.B., Stolbov V.Yu., **Batin S.E.**, Boyarshinov D.A. Methodology to estimate the minimum number of experiments and key microstructural parameters in macroscopic strength properties evaluation // ZAMM Journal of applied mathematics and mechanics: Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik. – 2019. – №3, Vol. 99. – 9 p. – DOI: 10.1002/zamm.201800259.

### *Публикации в изданиях, включенных в Перечень рецензируемых научных изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученой степени кандидата наук*

4. **Батин С.Е.** Определение размеров представительного изображения для оценки структурных характеристик материала // Прикладная математика и вопросы управления/Applied Mathematics and Control Sciences. – 2019. – №3. – С.103–115.

### *Свидетельства о государственной регистрации программ для ЭВМ и патенты на изобретения*

5. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ 2018661275. Российская Федерация. Нечеткий определитель комплексных свойств материалов (НОКСМ) / М.Л. Бартоломей, **С.Е. Батин**, Д.А. Бояршинов, М.Б. Гитман; правообладатель Пермский национальный исследовательский политехнический университет. – № 2018618635; поступл. 13.08.2018; опубли. 04.09.2018, Бюл. № 9.

6. Патент на изобретение. Способ определения параметров термомеханической обработки и химического состава функциональных материалов с помощью глубокой нейронной сети / Ключев А.В., Столбов В.Ю., Гитман М.Б., Клестов Р.А., **Батин С.Е.** патентообладатель Пермский национальный исследовательский политехнический университет. – № 2 704 751 Дата подачи заявки: 30.10.2018. Опубликовано: 30.10.2019. Бюл. №.31.

## *Другие статьи и материалы конференций*

7. **Батин С.Е.**, Гитман М.Б. Преобразование многомерной случайной величины // Материалы Всероссийской конференции молодых ученых и студентов «Математическое моделирование в естественных науках». – Пермь: Изд-во ПНИПУ. 2015.Т.1. – С. 52–54.
8. **Батин С.Е.**, Гитман М.Б. Об одном способе определения совместной плотности распределения функции нескольких случайных величин // Прикладная математика и вопросы управления. 2016. №1. С.59–66.
9. **Батин С.Е.**, Бояршинов Д.А., Гитман М.Б. Определение физико-механических свойств функциональных материалов на основе анализа зеренно-фазовой структуры // Материалы Всероссийской конференции молодых ученых и студентов «Математическое моделирование в естественных науках». – Пермь: Изд-во ПНИПУ. 2016.Т.1. – С. 39–44.
10. **Батин С.Е.**, Бояршинов Д.А., Гитман М.Б. Мера близости для специальных нечетких множеств // Материалы конференции «Прикладная математика, механика и процессы управления». – Пермь: Изд-во ПНИПУ. 2016. – С. 67–69.
11. **Батин С.Е.**, Гитман М.Б. Комплексное оценивание прочностных свойств функциональных материалов на основе анализа параметров зёрненно-фазовой структуры // Материалы конференции «Управление большими системами. УБС-2017». – Пермь: Изд-во ПНИПУ. 2017. – С. 496–511.
12. **Батин С.Е.**, Гитман М.Б., Столбов В.Ю. Двухуровневая модель оценивания эксплуатационных характеристик функционального материала // Материалы конференции «Новые технологии в научных исследованиях, проектировании, управлении, производстве». – Изд-во ВГТУ. 2017. – С. 25–30.
13. **Батин С.Е.**, Бартоломей М.Л., Бояршинов Д.А., Гитман М.Б. Анализ влияния структуры микроповрежденности на усталостную прочность металлического функционального материала // Материалы конференции «Перспективные материалы конструкционного и медицинского назначения». – Томск: Изд-во ТПУ. 2018. – С. 34–35.
14. **Батин С.Е.**, Бартоломей М.Л., Бояршинов Д.А., Гитман М.Б. Оценка усталостной долговечности металлического функционального материала на основе данных о его микроповрежденности // Материалы конференции «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред». – М.: Изд-во ИПМ РАН. 2018. – С. 16.
15. Gitman I.M., Gitman M.B., **Batin S.Ye.**, Boyarshinov D.A. Prediction of mechanical characteristics of functional materials based on fuzzy sets // Материалы международной научно-технической конференции «Функциональные материалы: прогнозирование свойств и технологии изготовления». – Пермь: Изд-во ПНИПУ. 2019. – С. 51.
16. **Батин С.Е.**, Бартоломей М.Л., Бояршинов Д.А., Гитман М.Б. Прогноз усталостной долговечности функционального материала по заданным параметрам нагружения // Материалы XXI международной конференции по вычислительной математике и современным прикладным программным системам. – М.: Изд-во МАИ. 2019. С. 223–225.
17. **Батин С.Е.**, Столбов В.Ю. Метод оценки представительности изображения микроструктуры функционального металлического материала // Материалы конференции «Механика композиционных материалов и конструкций, сложных и гетерогенных сред». – Изд-во ООО «Сам Полиграфист». 2019. – С. 142.